

Jakub GAC, Leon GRADOŃ

e-mail: j.gac@ichip.pw.edu.pl

Katedra Inżynierii Procesów Zintegrowanych, Wydział Inżynierii Chemicznej i Procesowej, Politechnika Warszawska, Warszawa

## Symulacje numeryczne ociekania włókien o zmodyfikowanej powierzchni

### Wstęp

Ociekanie włókien filtracyjnych jest ważnym zjawiskiem towarzyszącym filtracji aerozoli ciekłych na filtrach włóknistych. Od efektywności ociekania zależy spadek ciśnienia na filtrze jak również czas pracy wkładu filtracyjnego. Z praktycznego punktu widzenia korzystna jest możliwie jak największa szybkość ociekania włókien, co zapewnia szybsze usuwanie zdeponowanego płynu z wkładu filtracyjnego. Stąd wynika dążenie do zaprojektowania filtra, który charakteryzowałby się wysoką efektywnością ociekania.

Szybkość ociekania zależy od trzech czynników: średnicy włókna (włókna o większej średnicy charakteryzują się większą szybkością ociekania), kąta zwilżania włókna przez płyn oraz struktury powierzchni włókna. Wpływ struktury powierzchni ciała stałego na szybkość ociekania przejawia się poprzez zmianę wartości pozornego kąta zwilżania. Wartość tego kąta jest rezultatem oddziaływania pomiędzy linią kontaktu trzech faz a nierównościami powierzchni [Marmur, 2003]. W przypadku, gdy płyn tworzący kroplę wnika swobodnie pomiędzy nierównościami, pozorny kąt zwilżania dany jest przez równanie Wenzela [1936]:

$$\cos \vartheta^* = r \cos \vartheta \quad (1)$$

natomiast w przeciwnym przypadku – przez równanie Cassie-Baxtera [1944]:

$$\cos \vartheta^* = f_1 \cos \vartheta - f_2 \quad (2)$$

gdzie:

- $\vartheta^*$  – pozorny kąt zwilżania,
- $\vartheta$  – kąt zwilżania na gładkiej powierzchni,
- $r$  – stosunek całkowitego pola powierzchni pomiędzy kroplą a ciałem stałym do pola rzutu tej powierzchni  $r \geq 1$ ,
- $f_1$  i  $f_2$  – ułamki powierzchni stykającej się z cieczą oraz z powietrzem, odpowiednio.

Oba te równania zostały otrzymane przy dwóch istotnych założeniach. Pierwsze mówi o tym że rozmiar kropli jest znacznie większy od rozmiaru nierówności powierzchni, tak aby wpływ tych nierówności mógł zostać uśredniony.

Drugie założenie przyjmuje, że promień krzywizny powierzchni ciała stałego jest znacznie większy od rozmiaru kropli. Wynika stąd, że równ. (1) i (2) mogą być stosowane dla przypadku dużych (w porównaniu z rozmiarem nierówności) kropli na włóknach. W przeciwnym przypadku w celu wyznaczenia kształtu kropli należy wyznaczyć z bezpośredniego rozwiązania równań dynamiki płynu.

### Symulacje ruchu kropli na cienkim włóknie

W przypadku, gdy rozważany jest ruch kropli na włóknie, którego średnica jest mała zarówno w porównaniu z rozmiarami kropli jak również z rozmiarami nierówności, a równocześnie średnica kropli jest porównywalna ze średnicą włókna, ruch kropli może być modelowany w efektywny sposób za pomocą metody gazu sieciowego Boltzmanna LBM (*Lattice Boltzmann Method*) [Gunstensen i Rothman, 1991; Gac i Gradoń, 2011; 2012].

Podstawowym pojęciem metody gazu sieciowego Boltzmanna jest zdyskretyzowana funkcja gęstości rozkładu prawdopodobieństwa

$f_i(\mathbf{x}, t)$ , gdzie indeks  $i$  numeruje dopuszczalne kierunki prędkości. Ewolucję funkcji gęstości rozkładu prawdopodobieństwa opisuje następujące równanie różnicowe będące dyskretną formą równania kinetycznego Boltzmanna:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t+1) = f_i(\mathbf{x}, t) + \Omega_i[f_i(\mathbf{x}, t)], \quad (3)$$

gdzie

$\mathbf{e}_i$  –  $i$ -ty dyskretny kierunek prędkości, łączący punkt  $\mathbf{x}$  z jednym z sąsiednich punktów siatki numerycznej

$\Omega_i[f_i(\mathbf{x}, t)]$  – operator kolizji, stanowiący dyskretną formę całki zderzeń w równaniu kinetycznym Boltzmanna,

$\tau$  – tzw. czas relaksacji,

$f_i^{eq}$  – równowagowa wartość funkcji rozkładu gęstości prawdopodobieństwa.

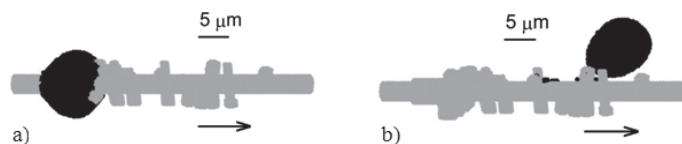
Spśród kilku wyrażeń na operator kolizji, spotykanych w literaturze, najpowszechniej używane jest przybliżenie Bhatnagara-Grossa-Krooka (BGK):

$$\Omega_i[f_i(\mathbf{x}, t)] = \frac{1}{\tau} [f_i^{eq} - f_i(\mathbf{x}, t)] \quad (4)$$

W równ. (3) najpowszechniej stosowaną formą wyrażenia na  $f_i^{eq}$  jest równanie [Chen i Doolen, 1998]:

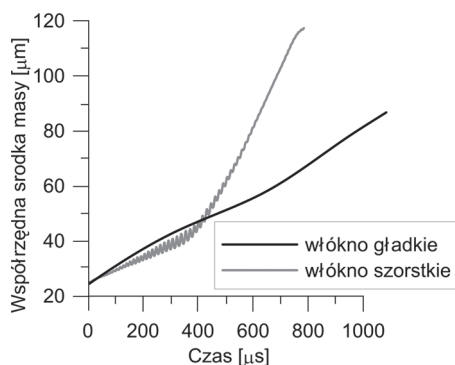
$$f_i^{eq} = \rho w_i \left[ 1 + 3\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{v} + \frac{9}{2} (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{v})^2 - \frac{3}{2} \mathbf{v}^2 \right] \quad (5)$$

Symulacje przeprowadzone metodą LBM pokazują istnienie dwóch charakterystycznych zjawisk związanych z niejednorodnością powierzchni włókna [Gac i Gradoń, 2012]. Pierwszym z nich jest zwiększenie pozornego kąta zwilżania, co wynika z istnienia poduszek gazowych pomiędzy nierównościami powierzchni. Efekt ten przyspiesza ruch kropli po włóknie. Ponadto, zwiększenie kąta zwilżania może prowadzić do zmiany konformacji kropli z osiowoosymetrycznej na asymetryczną, jak to zostało przedstawione na rys. 1. Ta zmiana konformacji powoduje dodatkowy wzrost szybkości ociekania, gdyż krople asymetryczne doznają mniejszych oporów ruchu niż krople osiowoosymetryczne ze względu na mniejszą powierzchnię kontaktu. Efekt ten jest widoczny na wykresie zależności położenia środka masy kropli od czasu, przedstawionym na rys. 2. Po zmianie konformacji, która następuje dla czasu symulacji równego około 450  $\mu\text{s}$ , prędkość kropli gwałtownie rośnie.

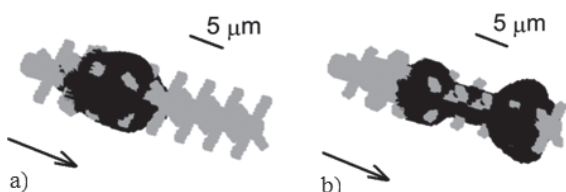


Rys. 1. Kształt kropli poruszającej się po szorstkim włóknie. Można rozpoznać przejście z konformacji osiowoosymetrycznej (a) do asymetrycznej (b). Kierunek ruchu kropli oznaczono strzałkami

Drugim obserwowanym efektem jest zjawisko *zaczepienia* linii kontaktu na nierównościach powierzchni. To zjawisko jest obserwowane szczególnie wyraźnie w przypadku włókna z występiami rozmieszczonymi regularnie lub prawie regularnie. Zjawisko *zaczepienia* linii kontaktu prowadzi do wydłużenia kropli, co pokazano na rys. 3a, a w konsekwencji do spowolnienia ruchu kropli w stosunku do ruchu na włóknie o gładkiej powierzchni. Efekt ten widać wyraźnie na wykresie zależności położenia środka masy kropli od czasu. Wykres taki przedstawio-

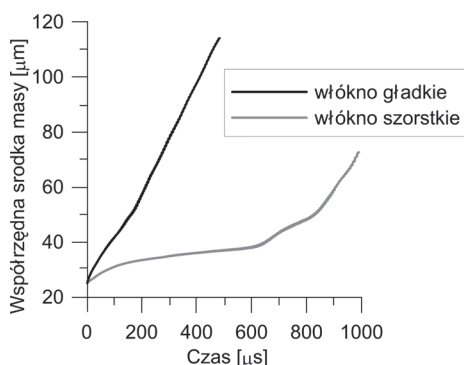


Rys. 2. Zależność położenia środka masy kropli od czasu na włóknie gładkim i szorstkim. Wzrost prędkości wynika ze zmiany konformacji kropli



Rys. 3. Kształt kropli poruszającej się po szorstkim włóknie w przypadku symetrycznie rozmieszczonych występów. Zjawisko zaczepienia linii potrójnej prowadzi do wydłużenia (a) lub rozpadu (b) kropli. Kierunek ruchu kropli oznaczono strzałkami

no na rys. 4. Można zaobserwować, że początkowo kropla porusza się bardzo powoli – w tym czasie zmienia się jej kształt. Po osiągnięciu kształtu równowagowego jej prędkość wzrasta, jednak w dalszym ciągu jest mniejsza, niż prędkość kropli na gładkim włóknie.



Rys. 4. Zależność położenia środka masy kropli od czasu na gładkim i szorstkim włóknie. Spowolnienie ruchu wynika z „zaczepienia” linii kontaktu

W przypadkach dużych liczb *Webera* jak również występów o znacznej wysokości może dojść nawet do rozpadu kropli, jak to pokazano na rys. 3b. Jednak w przypadku ociekania włókien związanego z filtracją aerozoli ciekłych takie warunki na ogół nie zachodzą.

### Uwagi na temat ruchu kropli na grubym włóknie

W przypadku, gdy średnica włókna jest znacznie większa od średnicy kropli, bezpośrednie modelowanie ruchu kropli przy pomocy metody opisanej w poprzednim rozdziale wymagałoby użycia siatki numerycznej o bardzo dużej liczbie węzłów. To pociągałoby za sobą duże zużycie pamięci komputera oraz wydłużało czas obliczeń. Dlatego też powyższą metodę należy uznać za mało efektywną w odniesieniu do włókien o dużej średnicy. Zamiast niej stosujemy metodę opartą na statystycznym opisie powierzchni włókien.

Jak już wspomniano, opis ten prowadzi do równania *Wenzela* lub *Cassie-Baxtera*, które pozwalają wyznaczyć wartość pozornego kąta

zwilżania na płaskiej szorstkiej powierzchni. Równania te są również słuszne również w przypadku powierzchni o nierównej krzywiznie [Bormashenko, 2009].

Biorąc pod uwagę powyższe informacje, ruch kropli na grubym włóknie można podzielić na trzy następujące etapy. W pierwszym etapie następuje wzrost kropli. Krople o zbyt małej masie, aby ich siła ciężkości przeważała siły *zaczepienia* linii kontaktu pozostają w spoczynku i zwiększają swoją masę poprzez koalescencję z innymi kroplami.

W drugim etapie, gdy kropla staje się wystarczająco duża, aby jej siła ciężkości przeważała siły przylegania do włókna, zaczyna się poruszać po włóknie. Krople o stosunkowo małej średnicy przyjmują konformację asymetryczną. Wreszcie w trzecim etapie kropla, na skutek koalescencji z innymi kroplami, zwiększa swoją średnicę do dostatecznie dużych rozmiarów i przyjmuje konformację osiowoosymetryczną. Prowadzi to zwykle do spadku prędkości poruszania się kropli.

### Wnioski

W pracy przedstawiono wyniki symulacji numerycznych ruchu kropli na włóknach filtracyjnych, zarówno o gładkiej jak i szorstkiej powierzchni. użytą metodą numeryczną była dwufazowa metoda gazu sieciowego *Boltzmana*, która pozwala w prosty i efektywny sposób modelować przepływy wielofazowe.

W wyniku przeprowadzonych symulacji zaobserwowano, że modyfikacja powierzchni włókien może wpływać dwójako na prędkość poruszających się po niej kropli. Pierwszym zaobserwowanym efektem jest wywołanie zmiany konformacji kropli z osiowoosymetrycznej do asymetrycznej oraz przejście do stanu zwilżania heterogenicznego powierzchni. W konsekwencji, prowadzi to do wzrostu kąta zwilżania, a co za tym idzie – prędkości kropli. Drugi zaobserwowany efekt polega na *zaczepieniu* linii potrójnej na nierównościach powierzchni, co prowadzi do spowolnienia ruchu kropli.

Z przedstawionych wyników widać, że modyfikacja powierzchni włókien filtracyjnych w istotny sposób zmienia dynamikę i szybkość ich ociekania. Należy jednak podkreślić, że wpływ tej modyfikacji na ociekanie może prowadzić zarówno do poprawy, jak i pogorszenia efektywności usuwania zdeponowanego płynu z filtrów koalescencyjnych. Zależy to zarówno od charakteru modyfikacji, jak i wzajemnej wielkości kropli oraz włókien.

Sformułowanie pełnych wytycznych dotyczących modyfikacji powierzchni włókien filtracyjnych wymaga przeprowadzenia dalszych badań teoretycznych oraz eksperymentalnych, które obecnie są w toku.

### LITERATURA

- Bormashenko, E., 2009. Wetting of Flat and Rough Curved Surfaces, *J. Phys. Chem. C*, **113**, 17275-17277. DOI: 10.1021/jp905237v
- Cassie A.B.D., Baxter S., 1944. Wettability of porous surfaces. *Trans. Faraday Soc.*, **40**, 546-551. DOI: 10.1039/tf9444000546
- Chen S., Doolen G.D., 1998. Lattice-Boltzmann method for fluid flows, *Ann. Rev. Fluid Mech.* **30**, 329-364. DOI: 10.1146/annurev.fluid.30.1.329
- Gac J.M., Gradoń L., 2011. A two-dimensional modeling of binary coalescence time using the two-color lattice-Boltzmann method, *J. Aero. Sci.*, **42**, 355-363. DOI: 10.1016/j.jaerosci.2011.02.004
- Gac J.M., Gradoń L., 2012. Modeling of axial motion of small droplets deposited on smooth and rough fiber surfaces, *Coll. Surf. A*, **414**, 259-266. DOI: 10.1016/j.colsurfa.2012.08.041
- Gunstensen A., Rothman D., 1991. Lattice-Boltzmann studies of immiscible two phase flows through porous media, *Phys. Rev. A*, **43**, 4320. DOI: 10.1029/92JB02660
- Marmur A., 2003. Wetting on Hydrophobic Rough Surfaces: To Be Heterogeneous or Not To Be? *Langmuir* **19**, 8343-8348. DOI: 10.1021/la0344682
- Wenzel R.N., 1936. Resistance of solid surface to wetting by water. *Ind. Eng. Chem.*, **28**, 988-994. DOI: 10.1021/ie50320a024